# 6其他功能使用说明：

## 6.1计算相同小分子间的RMSD：

通过计算同一分子不同构象间的RMSD来衡量分子间的差异大小，可以用来评估对接结果的准确性。Vina分子对接的输出结果中，RMSD是以最优对接结果位姿为参考的，不能反应重对接情况下的对接准确性，因而需要自行评估重对接结果，另外某些情况下也要衡量不同对接结果间的差异大小。

(1)点击“选择参考配体”选定要计算RMSD的参考小分子(通常是实验测定的共晶分子)(.pdbqt)

(2)点击“选择计算配体所在路径”，选择包含所有要根据参考配体计算RMSD的配体所在路径(通常是分割后的对接结果，路径中所有的.pdbqt文件都会被认为是要计算的配体)

(3)点击“选择结果输出路径”，设置一个结果输出路径。

(4)点击“开始计算”，提示计算完成后点击"查看结果"即可。

！！！小分子不能是vina输出的包含所有构象的结果文件，请先使用结果分析中的功能将vina的结果分割后再计算RMSD。

！！！只能计算同一小分子的不同姿态间的RMSD，对于不同分子间的差异不能通过此RMSD计算方法衡量。

## 6.2双配体分子对接：

该功能是Vina1.2.0版本后新增功能，用于两个配体同时与受体发生相互作用的情形，如底物+辅酶+酶、抑制剂+底物+酶、抑制剂+辅酶+酶等。

(1)点击“选择配体1”、”选择配体2”选择两个待对接配体(不分主次，.pdbqt)

(2)点击”选择对接受体”选择受体蛋白(.pdbqt)

(3)点击”选择配置文件”选择对接参数文件

(4)点击”选择结果输出路径”，设置一个结果输出路径

(5)点击”开始对接”等待即可，对接完成后可在结果输出路径的对接日志中查看结合亲和力和结合构象。

！！！该功能目前不支持批量操作，因此选择的文件均为路径+文件名而不是纯路径。

！！！强烈建议使用该功能时选择size\_x/y/z尽可能小的对接配置文件，尤其不能使用盲对接方法，否则对接后可能两个配体相隔较远无实际价值。

## 6.3柔性对接（诱导契合对接）：

柔性对接（诱导契合对接）指的是活性位点处氨基酸残基及配体均为完全柔性的情形(Vina默认为半柔性对接，即只有配体为柔性)，该对接方法旨在研究配受体间更为细致的相互作用，故对接时间会显著增加。操作步骤如下：

1. 点击”选择对接配体”选择准备好的配体(.pdbqt格式)
2. 点击”选择对接受体”选择准备好的受体蛋白(.pdbqt格式)
3. 点击”选择结果输出路径”设置一个结果保存位置
4. 返回第1步设置MglTools的安装路径，如已设置则跳过此步。
5. 输入柔性氨基酸残基，建议选择2~5个同一结合位点处可能与配体有显著相互作用的氨基酸残基。输入格式：若受体蛋白为单链，可按以下格式输入：ARG8\_ILE84(不同氨基酸间以下划线分割)；若受体蛋白非单链，请按以下格式输入：hsg1:A:ARG8\_ILE84,hsg1:B:THR4(受体文件名称:大写链序号:大写氨基酸名及序号，不同氨基酸间以下划线分割，不同链间以英文逗号分割，氨基酸序号不能大于1000)

该步骤会将原pdbqt文件分为刚性受体和柔性氨基酸两部分，分别为\_rigid.pdbqt和\_flex.pdbqt，保存在原受体所在文件夹中。

该步骤也会自动生成对接配置文件，无须手动生成，保存在结果输出路径中。

1. 点击”开始对接”等待即可，对接完成后可在结果输出路径的对接日志中查看结合亲和力和结合构象。

！！！该功能目前不支持批量操作，因此选择的文件均为路径+文件名而不是纯路径。